



N° d'ordre.....

## THESE DE DOCTORAT

Présentée par

**Mlle : Ouafae NINIS**

Spécialité : Physique des matériaux et nanostructures

Sujet de la thèse : Nouveaux matériaux moléculaires pi-conjugués pour des applications photovoltaïques :  
Conception, Modélisation, et Caractérisation

**Thèse présentée et soutenue le 13 Février 2016 à 09H devant le jury composé de :**

Nom Prénom	Titre	Etablissement	
ABDI Farid	PES	FST de Fès	Président
BASSOU Hamdaoui	PES	FST de Marrakech	Rapporteur
BEJJIT Lahcen	PES	EST de Meknes	Rapporteur
ESSAHLAOUI Abdelouahed	PH	FP de taza	Rapporteur
ZGOU Hssaine	PH	FP de Ouarzazate	Examineur
TOUFIK Hamid	PH	FP de taza	Examineur
BENSALAH Mohammed	PA	FS d'Agadir	invité
ABARKAN Mustapha	PH	FP de taza	Co-Directeur de thèse
BOUACHRINE Mohammed	PES	EST de Meknes	Co-Directeur de thèse

Laboratoire d'accueil : Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur

Etablissement : Faculté Polydisciplinaire de Taza





**Titre de la thèse :** Nouveaux matériaux moléculaires pi-conjugués pour des applications photovoltaïques : Conception, Modélisation, et Caractérisation

**Nom du candidat :** Ouafae NINIS

**Spécialité :** Physique des matériaux et nanostructures

### **Résumé de la thèse**

La production onéreuse du silicium solaire a mobilisé les chercheurs pour réduire les coûts de production des cellules photovoltaïques, en d'autres termes retrouver une alternative à coût réduit. La découverte des semi-conducteurs organiques a donné naissance à une nouvelle génération de modules légers et flexibles avec des techniques de production très économiques, ce qui a apporté un changement révolutionnaire pour le photovoltaïque industrielle. Actuellement, plusieurs approches en ingénierie moléculaire visent toutes un meilleur contrôle des propriétés optoélectroniques et de la stabilité structurelle des matériaux conjugués pour devenir fonctionnelles au domaine photovoltaïque. Ce contrôle ne provient que d'une bonne compréhension des paramètres susceptibles de régir les mécanismes de transport de charge au sein du matériau.

Dans cette optique, ce travail de thèse s'inscrit dans le cadre générale de l'étude, à l'échelle moléculaire, de l'impact de la structure sur les propriétés électroniques optiques et photovoltaïques de composés conjugués. Nous avons mené une investigation théorique sur les oligopyrroles et les oligofuranes, pour voir en détail l'effet de la longueur de la chaîne ainsi que le dopage sur les propriétés électroniques et optiques. Les différents résultats théoriques sont établis en se basant sur les approches de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Ensuite nous proposons une famille de dérivés pyrroliques. Notre objectif est de développer de nouveaux composés moléculaires  $\pi$ -conjugués, en agissant sur la structure chimique de la molécule monomère du pyrrole, et encore mettre en évidence des matériaux susceptibles d'offrir des propriétés optoélectroniques remarquables en particulier de faibles énergies de gap. Les résultats obtenus montrent d'une manière générale que les propriétés structurelles et la substitution entraînent des changements positifs sur les propriétés optoélectroniques. D'autre part, trois nouveaux azo-colorants à base de Pyrrole ont été étudiés pour découvrir leur performance photovoltaïque à être utilisés comme sensibilisateurs dans les cellules solaires à colorants. Une autre approche consiste à étudier un nouveau copolymère PEDOT-PVK pouvant être utilisé comme sous-couche injectrice dans les dispositifs photovoltaïques à hétérojonctions. Des expériences ont été réalisées afin d'étudier le comportement diélectrique de ce copolymère en fonction de la température et en fonction de la fréquence.

**Mots clés :** Propriétés photovoltaïques, Energie de Gap, optoélectroniques, diélectriques, semi-conducteurs organiques, oligomères, DFT.